



University of Groningen

Algebraic descriptions of nuclear and molecular rotation-vibration spectra

Roosmalen, Onno Sjoerd van

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1982

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Roosmalen, O. S. V. (1982). Algebraic descriptions of nuclear and molecular rotation-vibration spectra: mean field techniques and interacting boson models. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

In dit proefschrift zijn twee hoofdlijnen te onderscheiden, namelijk de algebraïsche beschrijving van rotatie-vibratie spectra van kernen en moleculen en toepassing van zogeheten gemiddelde-veld technieken voor veel-deeltjes systemen.

De (recent ontwikkelde) algebraïsche modellen die aan de orde komen zijn het kern model van wisselwerkende bosonen (IBA), dat een geunificeerde beschrijving geeft van het collectieve gedrag van zware en middel-zware kernen, en op de groep $U(4)$ gebaseerde modellen voor rotatie en vibratie vrijheidsgraden van twee en meer-atomige moleculen. Het fysische object (de kern, resp. het molecuul) wordt gerepresenteerd door een verzameling van een gegeven (meestal groot) aantal (N) bosonen die een aantal (n) kwantum-toestanden kunnen bezetten. Zo'n beschrijving heeft twee belangrijke facetten: een algebraïsch en een groepen theoretisch aspect. Het eerste heeft te maken met het feit dat de eigentoeestanden op eenvoudige wijze door middel van diagonalisatie van de model Hamiltoniaan kunnen worden bepaald. Het laatste houdt verband met de structuur van het boson-systeem dat de mogelijkheid biedt gebruik te maken van eigenschappen van de groep $U(n)$. In het bijzonder kunnen bepaalde dynamische symmetrieën worden onderkend waarvoor het seculiere probleem simpel en analytisch oplosbaar is. Vanwege het abstracte karakter van een algebraïsche beschrijving wordt de toepasbaarheid allereerst geïllustreerd aan de hand van een directe vergelijking van theoretisch en experimenteel verkregen spectra. Dynamische symmetrieën spelen hierbij een belangrijke rol.

Voor veel-deeltjes systemen is het in de meeste gevallen onmogelijk een exacte beschrijving te geven van vooral tijdsafhankelijke processen (zoals meervoudige excitatie door wisselwerking met een uitwendige storing). Een benadering op de exacte oplossing kan dan worden verkregen door gebruik te maken van gemiddelde-veld technieken: de wisselwerking van één van de deeltjes in het systeem met alle andere wordt gemiddeld en benaderd door een zogenaamd gemiddeld-veld. Sinds kort is de belangstelling voor deze oplossingsmethode in de kernfysica toegenomen daar is aangetoond dat ze kan worden afgeleid gebruik makend van een pad-integraal representatie voor de S -matrix. De dynamica van het gemiddelde-veld dat uit de pad-integraal wordt verkregen is identiek aan die veelvuldig gebruikt in de tijdsafhankelijke Hartree-Fock (TDHF) benadering echter de randvoorwaarden zijn anders. Dit heeft al geleid tot enkele studies waarin de gemiddelde-veld en TDHF benaderingen worden vergeleken voor eenvou-

dige, exact oplosbare, modellen. In dit proefschrift wordt in dat verband het realistische $U(4)$ -model voor diatomische moleculen beschouwd.

Het toepassen van veel-deeltjes benaderingen op algebraïsche modellen is niet alleen interessant om deze methoden te testen, maar blijkt ook van fundamenteeler belang te zijn. Door de gemiddelde-veld benadering te formuleren in termen van coherente (collectieve boson) toestanden kan een klassiek equivalent van de algebraïsche Hamiltoniaan worden gevonden. Een geometrische interpretatie van de abstracte algebraïsche beschrijving en directe vergelijking met conventionele geometrische modellen wordt daardoor mogelijk. In geval van het IBA-model is dit van belang omdat het daarmee twee aspecten van het collectieve gedrag van kerndeeltjes in zich verenigt: het geometrische en het microscopische (de bosonen in het model kunnen worden geïnterpreteerd als paren nucleonen met totaal impulsmoment 0 en 2).

Na een beschrijving van eigenschappen van algebraïsche modellen in hoofdstuk II wordt in hoofdstuk III ingegaan op de feitelijke beschrijving van rotatie-vibratie spectra. Aangetoond wordt dat reeds met simpele model-Hamiltonianen een goede overeenkomst met energie-spectra van diatomische moleculen en kernen verkregen kan worden. Moleculaire E_1 (infrarood) overgangen blijken minder eenvoudig te reproduceren te zijn.

In hoofdstuk IV wordt aandacht besteed aan de formele aspecten van pad-integraal methodes voor veel-boson systemen. Twee verschillende representaties voor de kwantummechanische propagator (de gemiddelde-veld en de coherente-toestand functionaal integraal) worden vergeleken en blijken in leidende orde in $1/N$ identiek te zijn. Benaderingen toepasbaar op zowel statische als dynamische problemen worden bediscussieerd.

Toepassingen van gemiddelde-veld technieken, beschreven in hoofdstuk IV, komen aan de orde in hoofdstuk V. Centraal staat daar de klassieke limiet van algebraïsche Hamiltonianen en de interpretatie daarvan. De geometrie van systemen beschreven door een Hamiltoniaan met dynamische symmetrie worden nader beschouwd. Het blijkt ook mogelijk door middel van kwantisatie van oplossingen van de klassieke bewegings vergelijkingen spectra te herkrijgen die slechts in orde $1/N$ van de exacte verschillen.

In hoofdstuk VI wordt een beschrijving gegeven van drie en vier-atomige moleculen in termen van een algebraïsche structuur gebaseerd op de groep $U(4) \times U(4)$ en $U(4) \times U(4) \times U(4)$. Lineaire moleculen blijken te corresponderen met dynamische symmetrieën van het $O(4)$ type.

Om de gemiddelde-veld methode te testen worden in het laatste hoofdstuk

(VII) enkele tijdsafhankelijke $U(2)$ en $U(4)$ Hamiltonianen beschouwd waarvoor de S -matrix berekend wordt in bovengenoemde zowel als TDHF benadering. De resultaten worden vergeleken met een exacte berekening.

In appendix A wordt een nieuwe methode (gebaseerd op het gebruik van coherente toestanden) om representatie matrices voor de $U(n)$ groepen te bepalen toegepast op $U(4)$. Deze matrices blijken nodig te zijn voor berekeningen zoals beschreven in hoofdstuk VII. Aangegeven wordt hoe een generalisatie van de procedure naar $U(6)$ (IBA-model) kan worden verkregen. In appendix B tenslotte wordt uitgewerkt hoe overgangsmomenten van verschillende, algebraïsch gedefinieerde, operatoren kunnen worden bepaald in geval van het, met een $O(4)$ dynamische symmetrie beschreven, diatomische molecuul.